

УДК 543.422

РАСЧЕТ ТОРМОЗНОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ ОТДАЧИ, ВОЗНИКАЮЩЕГО ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ИЗЛУЧЕНИЕМ РАДИОИЗОТОПНЫХ ИСТОЧНИКОВ

А.Ю.Портной, Г.В.Павлинский, А.Ю.Духанин*, П.Зузаан**, Б.Эрдемчимег**
Институт прикладной физики при Иркутском государственном университете
664003, Иркутск, бул.Гагарина, 20.

* Иркутский государственный медицинский университет.

** Монгольский государственный университет.
portnoy@isem.sei.irk.ru

Поступила в редакцию 30 сентября 2002 г.

Предложены теоретические выражения, определяющие зависимость спектрального распределения тормозного излучения электронов отдачи (Комптоновских электронов) от элементного состава флуоресцирующего материала. Рассмотрен случай монохроматического первичного излучения радиоактивных источников ^{241}Am и ^{109}Cd . Выполнен расчет рассматриваемого распределения для некоторых элементов.

Портной Александр Юрьевич - аспирант Иркутского государственного университета.

Область научных интересов: взаимодействие излучения с веществом.

Автор 10 опубликованных работ.

Павлинский Гелий Вениаминович - доктор физико-математических наук, НИИ прикладной физики Иркутского государственного университета.

Область научных интересов: взаимодействие излучения с веществом, рентгено-спектральный анализ.

Автор 160 опубликованных работ.

Духанин Алексей Юрьевич - старший преподаватель Иркутского государственного медицинского университета.

Область научных интересов - взаимодействие

рентгеновского излучения с веществом.

Автор 10 опубликованных работ.

Зузаан Пурэв - кандидат физико-математических наук, заместитель директора центра ядерных исследований Монгольского государственного университета, Монголия.

Область научных интересов: рентгенофлуоресцентный анализ.

Автор 120 опубликованных работ.

Эрдемчимег Батчулун - научный сотрудник Монгольского государственного университета, Монголия.

Область научных интересов: рентгеновский анализ.

Автор более 10 опубликованных работ.

Введение

Знание составляющих фона и их зависимости от условий возбуждения рентгеновской флуоресценции необходимо для выбора оптимальных режимов работы аппаратуры с целью обеспечения максимальной контрастности аналитического сигнала в рентгенофлуоресцентном анализе (РФА).

Физические процессы, приводящие к возникновению фонового излучения при возбуждении образца монохроматическим источником, нельзя

считать полностью изученными. Если понимать под фоном непрерывное излучение в области аналитических линий характеристического спектра, возникающее в облучаемом образце и на деталях аппаратуры, то к настоящему времени рассмотрены только:

- однократно и многократно рассеянное облучаемым излучением [1 - 5];

- тормозное излучение фото- и Оже - электронов, возникающих в облучаемом материале [6].

Другие ранее рассмотренные составляющие рентгеновского фона связаны с прохождением рентгеновского излучения через систему выделения и регистрации аналитического сигнала [5, 7-11]. Они не связаны с фоновым излучением флуоресцирующего образца и, в принципе, могут быть устранены путем совершенствования аппаратуры.

Среди рассмотренных в настоящее время процессов формирования фона рентгеновского флуоресцентного излучения обойден вниманием процесс торможения электронов отдачи, возникающих при комптоновском рассеянии. В работе [3] лишь упоминается об этом возможном источнике фона, однако сколько-нибудь полного рассмотрения указанного процесса нами в литературных источниках не обнаружено. Между тем при Комптоновском рассеянии фотона с энергией 60 кэВ (радиоизотоп ^{241}Am) на свободном электро- не энергия электронов отдачи достигает 11,5 кэВ, то есть их тормозное излучение появляется в области К-серии характеристических линий элементов с атомными номерами $Z < 32$.

Целью данной работы является теоретическое рассмотрение процесса формирования рентгеновского фона, обусловленного возникновением в облучаемом образце непрерывного тормозного спектра электронов отдачи.

Теория

Возникновение тормозного фотона при комптоновском рассеянии первичного фотона происходит по следующей схеме: первичный фотон \rightarrow электрон отдачи (комптоновское взаимодействие) \rightarrow фотон тормозного излучения.

Для упрощения расчетов зададимся следующими ограничениями:

- образец будем считать массивным и однородным;

- поскольку длина свободного пробега электрона в веществе много меньше длины свободного пробега рентгеновского фотона, то процесс генерации тормозного излучения примем происходящим в точке комптоновского взаимодействия;

- вследствие того что направление движения электрона отдачи очень быстро приобретает произвольное направление, поток электронов будем считать изотропным.

С использованием этих допущений для спектральной интенсивности $dN_c(E)$ тормозного излучения электронов отдачи с энергией E (на интервал энергии dE), приходящейся на один фотон первичного монохроматического излучения с энергией E_0 , можно написать следующее выражение:

$$\frac{dN_c(E)}{dE} = \frac{\text{Const}}{\frac{\mu(E_0)}{\sin(\varphi)} + \frac{\mu(E)}{\sin(\psi)}} \cdot \int_0^{E_c \max} P_{E_0 \rightarrow E_e} \cdot P_{E_e \rightarrow E} \cdot dE_e \quad (1)$$

где $P_{E_0 \rightarrow E_e}$ - вероятность возникновения при комптоновском взаимодействии электрона отдачи с энергией E_e ; $P_{E_e \rightarrow E}$ - вероятность того, что электрон отдачи с энергией E_e при торможении даст фотон с энергией E . Интеграл берется по всей области энергий возникающих электронов отдачи E_e . При энергии электронов E_e меньше энергии фотона E эту вероятность считаем равной нулю; $\mu(E_0)$ и $\mu(E)$ - массовые коэффициенты поглощения первичного и тормозного излучения соответственно, φ и ψ - углы падения первичного и выхода тормозного излучения соответственно; Const - константа, определяемая геометрией спектрометра и некоторыми фундаментальными параметрами, не зависящими от энергии электронов и фотонов первичного и тормозного излучения.

Рассмотрим процесс образования потока электронов отдачи в образце и их энергетический спектр. Вероятность комптоновского взаимодействия фотона с электроном атома определяется [11] следующим дифференциальным сечением рассеяния:

$$\frac{d\sigma_{am}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{KNT}}{d\Omega} \cdot F_{nk} \quad (2)$$

где F_{nk} - атомный фактор некогерентного взаимодействия; Ω - телесный угол комптоновского рассеяния;

$$\frac{d\sigma_{KNT}}{d\Omega} = \left(\frac{r_0^2}{2} \right) \cdot \left(\frac{E_s}{E_0} \right)^2 \cdot \left(\frac{E_0}{E_s} + \frac{E_s}{E_0} - \sin^2(\Theta) \right) \quad (3)$$

- дифференциальное сечение рассеяния Клейна-Нишины-Тамма; r_0 - классический радиус электрона; Θ - угол рассеяния при комптоновском взаимодействии.

Фактор некогерентного рассеяния F_{nk} может быть рассчитан [12] по формуле

$$F_{nk} = Z \cdot (1 - e^{-5w})$$

где $w = \frac{2.21}{Z^{0.66}} \cdot \frac{\sin(\frac{\Theta}{2})}{\lambda}$; Z - атомный номер рассеивающего элемента.

Предположим, что комптоновское рассеяние происходит на внешних слабо связанных электронах атома. Тогда энергию электрона отдачи, после комптоновского взаимодействия, считаем равной

$$E_e = E_0 - E_s = E_0 \frac{k(1 - \cos(\Theta))}{1 + k(1 - \cos(\Theta))} \quad (4)$$

$$\text{где } k = \frac{h \cdot \nu_0}{m_0 \cdot c^2} = \frac{E_0}{511.003}$$

Энергетическое распределение количества электронов по энергии

$$\frac{dN_e}{dE_e} = \frac{d\sigma_{am}}{d\Theta} \cdot \frac{1}{dE_e} = \frac{d\sigma_{KNT} \cdot F_{nk}}{d\Omega} \cdot \frac{2 \cdot \pi \cdot \sin(\Theta)}{dE_e}.$$

Таким образом, вероятность преобразования первичного фотона в комптоновский электрон с энергией E_e определяется выражением

$$P_{E_0 \rightarrow E_e} = \frac{dN_e}{dE_e} = \frac{d\sigma_{KNT} \cdot F_{nk}}{d\Omega} \cdot \frac{2 \cdot \pi}{E_0 \cdot k} \cdot \frac{1}{\left(\frac{1}{1+k \cdot (1-\cos(\Theta))} - \frac{k \cdot (1-\cos(\Theta))}{(1+k \cdot (1-\cos(\Theta)))^2} \right)}, \quad (5)$$

Для расчета тормозного излучения, образовавшегося в образце, воспользуемся формулой Крамерса [13].

$$P_{E_0 \rightarrow E} = \text{Const}_t \cdot Z \cdot \frac{E_0 - E}{E}, \quad \text{при } E_e < E.$$

$$P_{E_0 \rightarrow E} = 0, \quad \text{при } E_e > E. \quad (6)$$

Тогда, после замены в выражении (1) переменной dE_e на $d\Theta$, получаем:

$$\frac{dN_c(E)}{dE} = \frac{\text{Const}}{\frac{\mu(\lambda_0)}{\sin(\varphi)} + \frac{\mu(\lambda)}{\sin(\psi)}} \int_0^\pi \frac{d\sigma_{am}}{d\Omega} \cdot \frac{2 \cdot \pi \cdot \sin(\Theta)}{d\Omega} \cdot P_{E_0 \rightarrow E} \cdot d\Theta. \quad (7)$$

или

$$\frac{dN_c(\lambda)}{d\lambda} = \frac{dN_c(E)}{dE} \cdot \frac{dE}{d\lambda}. \quad (8)$$

где Const включает в себя Const_t .

Полученные выражения использованы для расчетов энергетического распределения электронов отдачи и их тормозного излучения.

Результаты вычислений

Естественно ожидать, что роль тормозного излучения электронов отдачи в формировании рентгеновского фона будет тем больше по сравнению с ролью фото- и Оже-электронов [6], чем значительнее комптоновское рассеяние по сравнению с фотоэлектрическим поглощением.

На рис. 1 сопоставлены зависимости массовых коэффициентов фотоэлектрического поглощения $\tau(l)$ и комптоновского рассеяния $\nu(l)$ от длины волны взаимодействующего с образцом излучения для кислорода, кремния и меди.

Массовый коэффициент комптоновского рассеяния рассчитан по формуле

$$\nu(\lambda) = \sigma_{am} \cdot \frac{N_A}{A}, \quad (8)$$

где N_A - число Авогадро; A - атомный вес и

$$\sigma_{am} = \int_0^\pi \frac{d\sigma_{am}}{d\Omega} \cdot 2 \cdot \pi \cdot \sin(\Theta) \cdot d\Theta.$$

Из рис. 1 следует, что для кислорода в области до 0.4 А (около 30 кэВ) массовый коэффициент комптоновского рассеяния выше, чем массовый коэффициент поглощения. Для Si равенство коэффициентов поглощения и комптоновского рассеяния соответствует длине волны 0.2 А (около 60 кэВ), а для Cu - 0.1 А (примерно 120 кэВ). В дальнейшем мы ограничимся расчетами для энергий, соответствующих источникам ^{241}Am (60 кэВ) и ^{109}Cd (22 кэВ), наиболее часто используемых на установках РФА с радиоизотопным возбуждением.

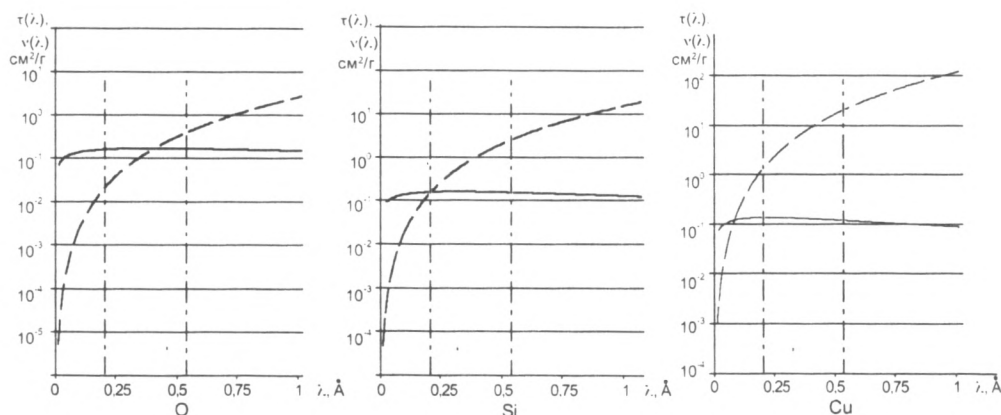


Рис.1. Зависимость массового коэффициента поглощения $\tau(\lambda)$, рассчитанная согласно работе [14] (штриховая линия) и массового коэффициента комптоновского рассеяния $\nu(\lambda)$, рассчитанного по формуле (9) (непрерывная линия), от длины волны для кислорода, кремния, железа (штрих-пунктирной линией показаны длины волн с энергией 60 кэВ и 22 кэВ соответственно)

На рис.2. представлен энергетический спектр электронов отдачи при воздействии монохрома-

тического излучения на образец (кислород и кремний). Спектр рассчитан согласно формуле (5).

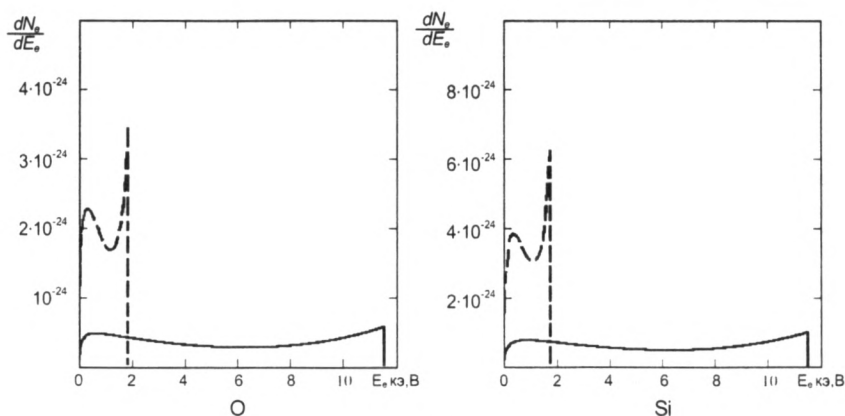


Рис.2. Энергетический спектр электронов $\frac{dN_e}{dE_e}$ отдачи согласно формуле (5) для кислорода и кремния при энергии первичного излучения 22 кэВ (пунктир) и 60 кэВ (непрерывная)

Как видно из рис.2, площадь под кривыми как $\frac{dN_e}{dE_e}$ для кислорода, так и для Si слабо зависит от энергии рассеиваемого излучения. Такое поведение функции объясняется практическим отсутствием наблюдаемой на рис.1 зависимости интегрального сечения некогерентного рассеяния от энергии фотонов в рассматриваемой области энергий. Обрыв функции при максимальной энергии электрона объясняется тем, что вероятность возникновения электрона отдачи с энергией E_e , определяемая формулой (5), имеет ненулевое значение при $Q=p$.

Следует также отметить стремление функции $\frac{dN_e}{dE_e}$ к нулю при нулевой энергии электрона, обусловленное атомным фактором $F_{\text{ат}}$ и не наблюдаемое в энергетическом распределении комптоновского рассеяния на свободном электроне.

На рис.3 приведен тормозной спектр электронов отдачи, рассчитанный по формуле (8) для образцов из O, Si и Cu при энергии первичных фотонов, равной 60 кэВ (^{241}Am) и 22 кэВ (^{109}Cd).

Из рис. 3 видно существенное различие расположения на шкале длин волн тормозных спектров электронов отдачи при комптоновском рассеянии излучений ^{241}Am и ^{109}Cd . Кроме того, интенсивность тормозного излучения этих электронов для ^{109}Cd оказалась более чем на порядок меньше рассчитанной для ^{241}Am . Скачки, наблюдаемые в спектральных распределениях, обусловлены тем фактом, что процесс генерации тормозного излучения происходит внутри массивного образца.

Заключение

Полученное выражение для расчета интенсивности тормозного излучения электронов отдачи позволяет уточнить процесс формирования фона при рентгенофлуоресцентном анализе. Хотя расчеты выполнены для радиоизотопных источни-

ков монохроматического излучения, полученные результаты позволяют сделать заключение о необходимости учета рассматриваемого фактора при использовании неоднородного первичного излучения рентгеновских трубок.

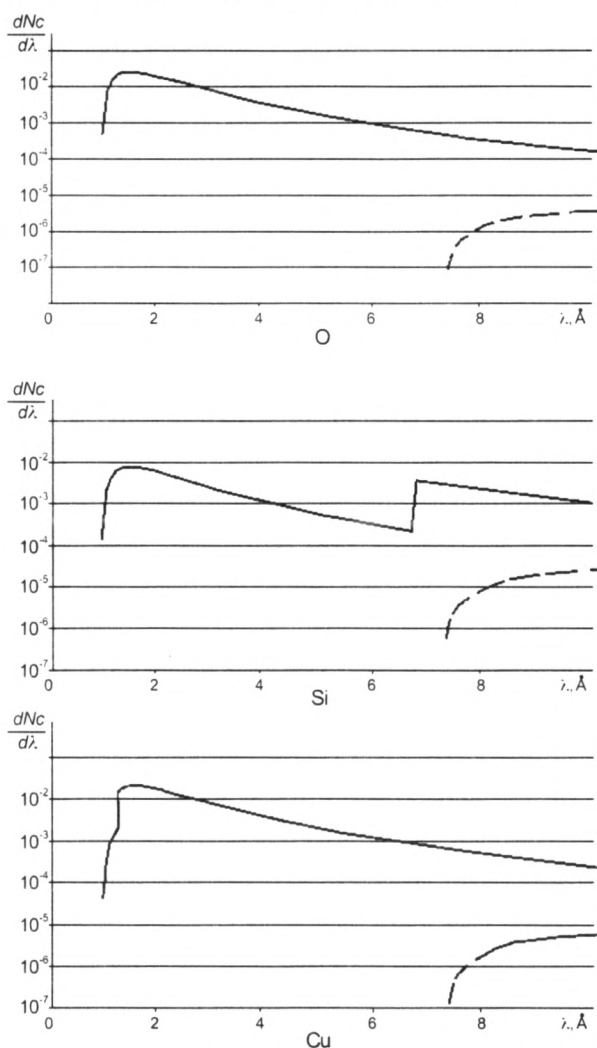


Рис.3. Тормозной спектр электронов отдачи для O, Si, Cu, рассчитанный по (8). Источники ^{241}Am , 60 кэВ (непрерывная линия), ^{109}Cd - 22 кэВ (пунктирная линия)

Действительно, на рентгеновские трубки подается, как правило, достаточно высокий потенциал порядка 40 кВ и более. При таких напряже-

ниях тормозное излучение электронов отдачи возникает уже в области К-флуоресцентного излучения элементов с атомными номерами $Z < 25$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бахтиаров А.В. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ в геологии и геохимии. М.: Недра, 1985. 144 с.
2. Fernandez J.E. Rayleigh and Compton scattering contributions to X-ray fluorescence intensity // X-ray spectrometry. 1992. V.21. P.57-68.
3. Fernandez J.E. Polarization effects on multiple scattering gamma transport / J.E.Fernandez, J.H.Hubbell, A.L.Hanson, L.V.Spenser // Radiation physics and chemistry. 1993. V.41, №4. P.579-630.
4. Белых В.В. Многократно рассеяное излучение при радиометрическом анализе / В.В.Белых, А.Н.Смагунова, В.А.Козлов // Журнал аналитической химии. 1994. Т.49, №10. С.1092-1096.
5. Ревенко А.Г. Исследование зависимости интенсивности рентгеновского фона в длинноволновой области от химического состава проб / А.Г.Ревенко, Г.В. Павлинский, Н.Ф. Лосев // Заводская лаборатория. 1974. Т.40, №11. С.1334-1338.
6. Павлинский Г.В. Роль .../ Иркутский гос. ун-т. Иркутск, 1983. 34. Деп. в ВИНТИ 2.08.83, № 4268-83.
7. Ревенко А.Г. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ природных материалов. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1994. 264 с.
8. Ложкин В.И. Исследование компонента рентгеновского фона, обусловленного флуоресценцией кристалла-анализатора / В.И.Ложкин, В.П.Афонин // Заводская лаборатория. 1976. Т.42, №9. С.1073-1074.
9. Keith H.D. Calibration and use of Lithium-drifted silicon detector for accurate analysis of X-ray spectra/ H.D.Keith, T.C.Loomis // X-Ray spectrometry. 1976. V.5. P.93-103.
10. Павлинский Г.В. Формирование фона кристалл-дифракционной аппаратуры в длинноволновой области рентгеновского спектра / Г.В.Павлинский, Д.В.Ившев, Н.Н.Имешкенова // Журнал аналитической химии. 1991. Т.46, №3. С.525-531.
11. Блохин М.А. Физика рентгеновских лучей. М.: ГИТТЛ, 1957. 518 с.
12. Бахтиаров А.В. Формулы для приближенного вычисления дифференциальных сечений рассеяния рентгеновского излучения малых энергий / А.В.Бахтиаров, Г.А.Пшеничный // Аппаратура и методы рентгеновского анализа. 1972. №11. С.200-218.
13. Kramers H.A. On the theory of X-ray absorption and continuous X-ray spectrum // Phil. Mag. 1923. V.46, №275. P.836-871.
14. Tinh T.P. New basic empirical expression for computing tables of X-ray mass attenuation coefficients / T.P.Thinh, J.Leroux // X-ray spectrometry. 1979. V.8, №2. P.85-91.

* * * * *

COMPTON ELECTRONS BREMSSTRAHLUNG CALCULATION AT X-RAY FLUORESCENCE EXCITATION BY RADIOISOTOPE SOURCE

A.Yu.Portnoy, G.V.Pavlinsky, A.Yu.Duhanin, P.Zuzaan, B.Erdemchimeg

It is offered the theoretical expressions related of a spectral distribution of a Compton electrons bremsstrahlung on sample element composition. The case of monochromatic primary radiation of radioactive sources ^{241}Am and ^{109}Cd is considered. The distribution calculations for some elements is made.